Noise-contrastive estimation of normalising constants and GANs

Contents

1 Fonctions génériques

```
library(ggplot2)
library(reshape)
library(matrixStats)
library(knitr)
library(dplyr)
```

```
## Warning: le package 'dplyr' a été compilé avec la version R 4.1.3

##
## Attachement du package : 'dplyr'

## L'objet suivant est masqué depuis 'package:matrixStats':
##
##     count

## L'objet suivant est masqué depuis 'package:reshape':
##
##     rename

## Les objets suivants sont masqués depuis 'package:stats':
##
##     filter, lag

## Les objets suivants sont masqués depuis 'package:base':
##
##     intersect, setdiff, setequal, union
```

1.1 Algorithme d'Hasting

Utilité : simuler selon $p_m(., \psi)$ pour un paramètre ψ choisi.

Argument	Type	Exemple	Indication
x	vecteur	rcauchy(100, 0, 1)	notre échantillon de densité inconnue
n	entier	100	taille de la simulation
psi	vecteur	c(0,1)	paramètres de la fonction h
h	fonction		fonction qui retourne $\overline{p_m}(., \psi)$

```
hasting = function(x, n, psi, h){
  y = c()
  y = append(y, sample(sample(x, 1)))
  for (i in 2:n){
    y_ = rnorm(1, y[i-1], 1)
    u = runif(1)
    if ( u <=
         (h(y_,psi) * dnorm(y_, y[i-1], 1))
         /(h(y[i-1],psi) * dnorm(y[i-1], y_, 1))
    ){
      y = append(y, y_)}
    else {
      y = append(y, y[i-1])
    }
  }
  return (y)
}
```

Note : on peut très certainement écrire sous forme matricielle cette fonction pour une meilleure performance.

1.2 MC MLE (Geyer)

Utilité : retourne une estimation des paramètres selon la méthode décrite dans le papier de Geyer.

```
mc_mle = function(x, n, psi, h){

  m = length(x)

  y = hasting(x, n, psi, h)

  L = function(theta){
    return(sum(log(h(x,theta)/h(x,psi))) - m*log(mean(h(y,theta)/h(y,psi))))
  }

  theta = optim(
    par = rep(1,length(psi)),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = L
  )$par

  return(theta)
}
```

1.3 NCE (Gutmann)

Utilité : Retourne l'estimation de la constante et des paramètres.

Argument	**Type**	**Exemple**	**Indication**
x	vecteur	rcauchy(100, 0, 1)	notre échantillon de densité inconnue
law_y	fonction	rnorm	fonction qui retourne un échantillon suivant la loi p_n
n	entier	100	taille de l'échantillon de bruit suivant la loi p_n
params_y	vecteur	c(0,1)	arguments de la fonction law_y
log_pm	fonction		fonction qui retourne le logarithme de la densité p_m
log_pn	fonction		fonction qui retourne le logarithme de la densité p_n
size_theta	entier	3	taille de θ, vaut habituellement 2 ou 3
method	string	"CG"	méthode d'optimisation, habituellement "CG" ou "BFGS"

```
nce = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n){

  y = do.call(law_y, c(list(n),params_y))

  m = length(x)

  h = function(u, theta){
    return( 1 / (1 + n/m * exp(log_pn(u) - log_pm(u, theta))))
  }

  J = function(theta){
    return( sum(log(h(x, theta))) + sum(log(1 - h(y, theta))) )
  }
```

```
  theta = optim(
    par = rep(1, size_theta),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = J
  )$par

  return(c(theta[-size_theta], exp(-theta[size_theta])))
}
```

1.4 Graphiques

Utilité : afficher l'histogramme pour un échantillon de données x.

```
print_hist = function(x) {
  df = data.frame(x = x)
  hist_x = ggplot(df, aes(x=x)) +
           geom_histogram(aes(y = stat(count)/sum(count)), bins = 20, color="white") +
           theme(aspect.ratio = 1) +
           labs(y = "Fréquence") +
           ggtitle("Distribution de l'échantillon x")
  print(hist_x)
}
```

Utilité : pour NCE, afficher l'évolution des paramètres au fur et à mesure de l'augmentation de n (la dimension de l'échantillon de bruit)

```
NCE_evol_params = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, ratio, steps, labels) {

  # Creation de l'abscisse
  m = length(x)
  N = seq(0, m*ratio, length.out = steps + 1)

  # Creation de l'ordonnée
  theta = c()
  for (n in N) {
    theta = append(theta, nce(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n))
  }

  # Formatage des données
  theta = t(rbind(matrix(theta, nrow = size_theta),N))
  df = as.data.frame(theta)
  df_melted = melt(df, id.vars = "N")

  # Plot
  plot_df = ggplot(df_melted, aes(x = N, y = value)) +
  geom_line(aes(color = variable, group = variable)) +
  geom_point(aes(color = variable, group = variable)) +
  labs(title = "Evolution des paramètres par rapport au bruit",
       x = "n (taille du bruit)",
       y = "Paramètres",
       color = "Légende") +
  scale_color_manual(labels = labels, values = c("blue", "red", "orange"))

  print(plot_df)
```

```
  #return(theta)
}
```

Note : il faudrait optimiser le temps de calcul de ces fonctions, peut-être en matriciel au lieu des boucles ou bien avec du calcul en parralèle sur CPU/GPU

2 Applications

2.1 Exemple basique : la loi normale

Soit x l'échantillon de taille m obtenu selon la loi de densité inconnue p_d.

On considère ici que p_d appartient à la famille de fonctions paramétrées par $\theta = (c, \mu, \sigma)$ suivante :

$$p_m(u;\theta) = \frac{1}{Z(\mu,\sigma)} \times exp\big[-\frac{1}{2}\big(\frac{u-\mu}{\sigma}\big)^2\big] \quad \text{d'où} \quad ln(p_m(u;\theta)) = c - \frac{1}{2}\big(\frac{u}{\sigma} - \frac{\mu}{\sigma}\big)^2$$

```
pm_barre = function(u, theta){
  return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}

log_pm = function(u,theta){
  return(theta[3] - 1/2 * (u/theta[2] - theta[1]/theta[2]) ** 2)
  # theta[1] = mu / theta[2] = sigma / theta[3] = c
}

log_pn_cauchy = function(u){
  return(log(dcauchy(u, mean(x), sd(x))))
}

m = 10000
n = 10000
x = rnorm(m, 2, 4)
size_theta = 3
```

```
# METHODE MC MLE
alpha = mc_mle(x, n, c(mean(x),sd(x)), pm_barre)
```

Crée un graphique qui prouve la convergence quand le ratio est de plus en plus élevé pour NCE.

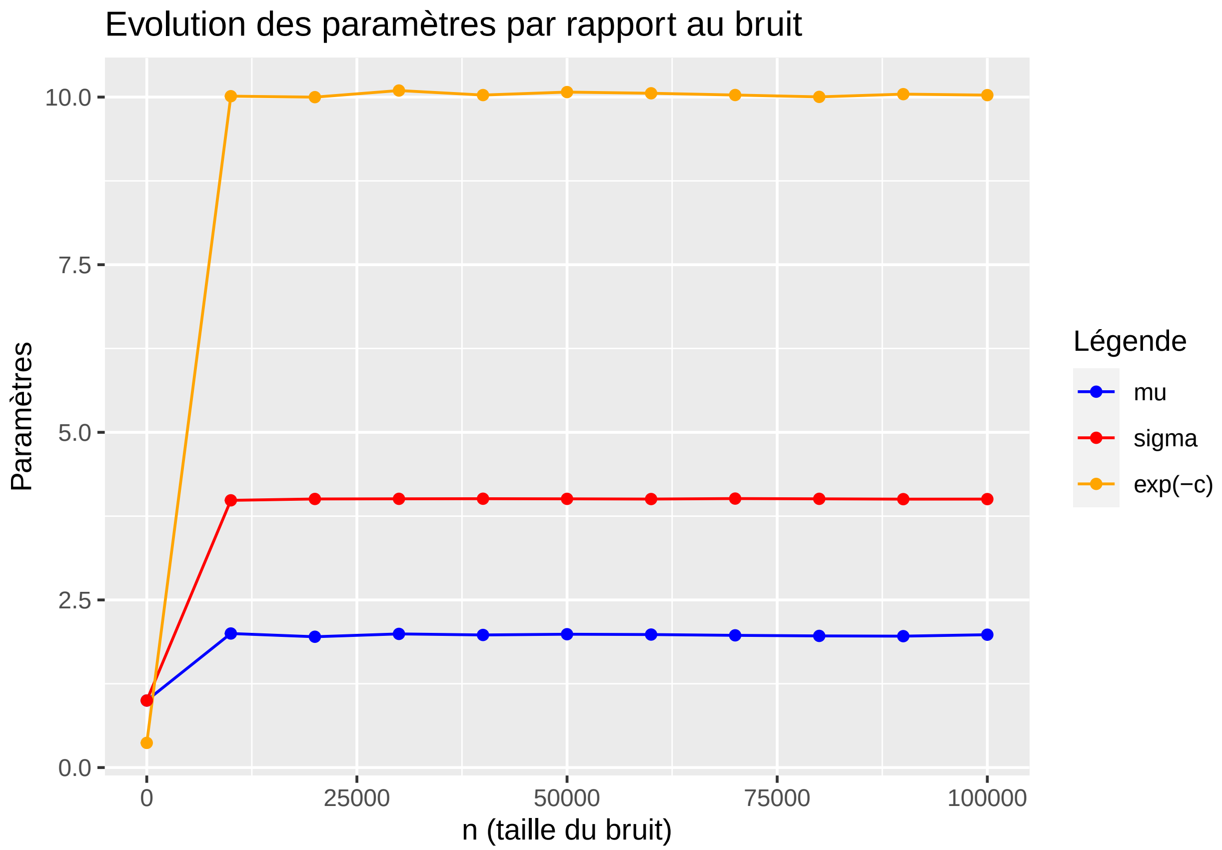
```
df_mcmle_2 = data.frame(matrix(ncol = 4, nrow = 0))
colnames(df_mcmle_2) = c("param_1", "param_2", "size_data", "ratio_noise_data")

M = c(1000, 10000)


for (m in M){
  x = rnorm(m, 2, 4)
  psi = c(mean(x), sd(x))
  N = c(1, 10)
  for (n in N) {
    for (i in 1:100) {
       df_mcmle_2[nrow(df_mcmle_2) + 1, ] = c(mc_mle(x, m*n, psi, pm_barre), m, n)
    }
  }
}

df_mcmle_2$size_data = as.factor(df_mcmle_2$size_data)
df_mcmle_2$ratio_noise_data = as.factor(df_mcmle_2$ratio_noise_data)

df_mcmle_filt = filter(df_mcmle_2, param_2 <= 6 & param_2 >= 0 & param_1 >= -2 & param_1 <= 6)
```

```
ggplot(df_mcmle_filt, aes(x = param_1, y = param_2, color = size_data, shape = ratio_noise_data)) + geom
```

```
# METHODE NCE
nce(x, rcauchy, c(mean(x),sd(x)), log_pm, log_pn_cauchy, size_theta, n)
```

```
## [1] 1.993723 3.976864 9.946572
```

```
NCE_evol_params(x, rcauchy, c(mean(x),sd(x)), log_pm, log_pn_cauchy, size_theta, 10, 10, c("mu", "sigma
```



3 Nouvelles approches

3.1 Bootstrap

```
# Calcul de {size_boot} estimateurs par bootstrap
NCE_bootstrap = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n, size_boot, labels) {
  m = length(x)
  theta_bootstrap = c()
  x_bootstrap = x
  for (i in 1:size_boot) {
    theta_bootstrap = append(theta_bootstrap, nce(x_bootstrap,
                                                  law_y,
                                                  params_y,
                                                  log_pm,
                                                  log_pn,
                                                  size_theta,
                                                  n))
    x_bootstrap = sample(x, size = m, replace=TRUE)
  }
  return(matrix(theta_bootstrap, nrow = size_theta))
}

# Plot la moyenne empirique des estimateurs bootstrap en fonction du nombre d'estimateurs
NCE_bootstrap_plot = function(matrix_theta_bootstrap) {

  # Formatage des données pour plot
  array_boot = 1:length(matrix_theta_bootstrap[1,])
  df = as.data.frame(cbind(t(rowCumsums(matrix_theta_bootstrap))/array_boot,array_boot))
  df_melted = melt(df, id.vars = "array_boot")

  # Plot
  plot_df = ggplot(df_melted, aes(x = array_boot, y = value)) +
  geom_line(aes(color = variable, group = variable)) +
  labs(title = "Evolution des paramètres par bootstrap",
       x = "Taille du bootstrap",
       y = "Paramètres",
       color = "Légende") +
  scale_color_manual(labels = labels, values = c("blue", "red", "orange"))
  print(plot_df)
}


# etude bootstrap de l'estimateur
bootstrap = function(matrix, alpha){
  return(data.frame(
    theta = matrix_theta_bootstrap[,1],
    biais = rowMeans(matrix_theta_bootstrap) - matrix_theta_bootstrap[,1],
    IC = rowQuantiles(matrix_theta_bootstrap, probs = c(alpha/2, 1-alpha/2))
  ))
}
```

```
x_test = rnorm(1000,2,4)

matrix_theta_bootstrap = NCE_bootstrap(x_test, rcauchy, c(mean(x_test),sd(x_test)), log_pm, log_pn_cauc
```

```
kable(bootstrap(matrix_theta_bootstrap, 0.05))
```

theta	biais	IC.2.5.	IC.97.5.
1.936371	0.0492498	1.651845	2.312487
3.902488	0.1196408	3.813712	4.246985
9.630470	0.4051670	9.330397	10.778868

3.2 Récursivité

Utilité : améliorer récursivement la précision de l'estimation via les estimations précédentes

```
mc_mle_recursif_3 = function(x, n, psi, h, size_of_loop){

  m = length(x)
  Y = c(hasting(x, n, psi, h))
  H_x = c(h(x,psi))
  H_y = c(h(Y,psi))

  for (i in 1:size_of_loop) {

    L = function(theta){
      return(sum(log(h(x,theta)/(H_x/i))) - m*log(mean(h(Y,theta)/(H_y/i))))
    }

    psi = optim(
      par = rep(1,length(psi)),
      gr = "CG",
      control = list(fnscale=-1),
      fn = L
    )$par

    y = hasting(x, n, psi, h)
    Y = append(Y, y)
    H_x = append(H_x, h(x,psi))
    H_y = append(H_y, h(y,psi))

    print(psi)
  }

  return(psi)
}
```

```
m = 10000
n = 10000
x = rnorm(m, 2, 4)
mc_mle_recursif_3(x, n, c(mean(x),sd(x)), pm_barre, 10)
```

```
## [1] 1.876141 3.876718
## [1] 1.853007 5.371401
## [1] 1.812246 7.538626
## [1]  1.897074 10.336002
## [1]  1.912451 12.636498
## [1]  1.891949 12.908425
```

```
## [1]  1.898139 14.119268
## [1]  1.962932 14.591078
## [1]  1.958768 15.767807
## [1]  1.975664 16.974365
```

```
## [1]  1.975664 16.974365
```

```
nce_recursif = function(x, law_y, params_y, log_pm, log_pn, size_theta, n, size_of_loop){

  y = do.call(law_y, c(list(n),params_y))

  m = length(x)

  for (i in 1:size_of_loop){

    h = function(u, theta){
      return( 1 / (1 + n/m * exp(log_pn(u) - log_pm(u, theta))))
    }

    J = function(theta){
      return( sum(log(h(x, theta))) + sum(log(1 - h(y, theta))) )
    }

    theta = optim(
      par = rep(1, size_theta),
      gr = "CG",
      control = list(fnscale=-1),
      fn = J
    )$par

    print(theta)

    y = do.call(law_y, c(list(n),theta[-size_theta]))

  }

  return(c(theta[-size_theta], exp(-theta[size_theta])))
}
```

```
nce_recursif(x, rcauchy, c(mean(x),sd(x)), log_pm, log_pn_cauchy, size_theta, n, 10)
```

```
## [1]  2.052997  3.913845 -2.282168
## [1]  2.019784  3.958556 -2.298372
## [1]  2.061356  3.955765 -2.296772
## [1]  2.064082  3.974025 -2.291295
## [1]  2.087392  3.905284 -2.280591
## [1]  2.032328  3.934656 -2.289859
## [1]  2.059526  3.954629 -2.292973
## [1]  2.051667  3.944881 -2.295505
## [1]  1.992623  3.969519 -2.304826
## [1]  2.075333  3.912958 -2.283047
```

```
## [1] 2.075333 3.912958 9.806513
```

3.3 Reverse logistic regression

La maximisation de la fonction objectif

$$l_n(\eta) = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n_j} log(p_j(X_{i,j}, \eta))$$

permet d'estimer les η (qui sont fonction des constantes de normalisation des h_j). On utilise les notations suivantes :

$$\eta_j = -log(Z_j) + log(\frac{n_j}{n}) \text{ avec } Z_j \text{ la constante de normalisation de } h_j$$

$$p_j(x) = \frac{h_j(x)e^{\eta_j}}{\sum_{k=1}^{m} h_k(x)e^{\eta_k}}$$

Exemple avec $m = 2$, $n = n_1 + n_2 = 1000 + 1000$, et pour coller avec les méthodes différentes on va prendre h_1 la densité non normalisée d'une $\mathcal{N}(\alpha)$ dont on a estimé α par MC MLE et h_2 la densité non normalisée d'une $\mathcal{N}(\psi)$ avec ψ qu'on choisit.

```
# REVERSE LOGISTIC REGRESSION

pm_barre = function(u, theta){
  return(exp(-0.5 * ((u - theta[1]) / theta[2]) ** 2))
}

x_test = rnorm(100000, 2, 4)
y_test = rnorm(100000, 2, 4)

f_test = function(eta) {
  alpha = c(2,4)
  psi = c(3,5)
  n1 = length(x_test)
  n2 = length(y_test)
  return(
    sum(log(pm_barre(x_test, alpha)*exp(eta[1]) / (pm_barre(x_test, alpha)*exp(eta[1]) + pm_barre(x_tes
    +
    sum(log(pm_barre(y_test, psi)*exp(eta[2]) / (pm_barre(y_test, psi)*exp(eta[2]) + pm_barre(y_test, a
    )
}


const_test = optim(
    par = c(0,0),
    gr = "CG",
    control = list(fnscale=-1),
    fn = f_test
  )$par
print(exp(-const_test + log(0.5)))
```

```
## [1] 0.4444277 0.5189995
```